二つの縮約された運動の記述について

（12月26日 受 理）

九大理　藤　坂　博　一

Mori[1]によって導入されたHeisenberg picture での射影演算子の方法による運動方程式系の縮約に関して，近年いくつかの発展が見られた。Mori の方法は本質的には，注目している物理量Aとそれ以外の物理量A′に対するそれぞれの運動方程式で，A′をAの関数（Aの過去の値を含む）として求め，それをAの式に代入すれば得られる。このとき過去の履歴が damping を与え，A′の初期値が揺動力を与えることになる。

一方，最近 Tokuyama と Mori[2]によって提案されたHeisenberg picture での周波数変調型の運動方程式の逓減は，変数A′を積分して了っているはずなのに過去の履歴が表われない。この点で筆者には何か奇妙な感じがしていたが，周波数変調型は物理的にどのような操作でA′を消去しているのか理解出来たようなので報告したい。

平衡系を考える。力学量A(t)（平均値はぬきさっている）の運動方程式は系のLiouville演算子をLとすると，

$$\frac{d}{dt}A(t)= iLA(t), \tag{1}$$

と書ける。一般に，(1)の右辺はA(t)とA′(t)の線型結合で書ける。ここでA′(t)は一般にA(t)の非線型結合，A(t)以外の自由度およびそれらの間の結合した複雑な関数である。これらをまとめてA′(t)とした。A′(t)をこのように定義すると(1)は，

$$\frac{d}{dt}A(t)=\hat{K}_{11}\cdot A(t)+\hat{K}_{12}\cdot A'(t), \tag{2}$$

となる。更にA′(t)の運動方程式は，

$$\frac{d}{dt}A'(t)= iLA'(t)=\hat{K}_{21}\cdot A(t)+\hat{K}_{22}\cdot A'(t), \tag{3}$$

と書ける。（古典，量子力学系に対して。）結合行列$\hat{K}_{ij}$（i，j＝1，2）はスカラーな定数である。更にA′(t)は，

$$(A'(o),\ A^*(o)) = 0, \tag{4}$$

を満すように選ばれているとしよう。＊はHermite 共役を表わす。ここで（，）は正準相関

$$(X,\ Y) = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta < e^{\lambda\mathcal{H}}\, x e^{-\lambda\mathcal{H}}\, Y > d\lambda, \tag{5}$$

を表わす。<…>は正準集団 $e^{-\beta\mathcal{H}}$ についての平均である。(4)は一般性を失う条件ではない。(2)，(3)より

$$(\dot{A}(0),\ A^*(0)) = \hat{K}_{11}\cdot(A(0),\ A^*(0)), \tag{6. 1}$$

$$(\dot{A}(0),\ A'^*(0)) = \hat{K}_{12}\cdot(A'(0),\ A'^*(0)), \tag{6. 2}$$

$$(\dot{A}'(0),\ A^*(0)) = \hat{K}_{21}\cdot(A(0),\ A^*(0)), \tag{6. 3}$$

$$(\dot{A}(0),\ A'^*(0)) = \hat{K}_{22}\cdot(A'(0),\ A'^*(0)), \tag{6. 4}$$

(6.1)より $\hat{K}_{11}$ は揺ぎの collective な運動を表わす振動数行列 $i\hat{\omega}$[1] に他ならない。
(6.2)，(6.3) より $(\dot{A}(0), A'^*(0))^* = (-\dot{A}'(0), A^*(0))$ を用いると

$$(A'(0),\ A'^*(0))\cdot\hat{K}^*_{12} = -\hat{K}_{21}\cdot(A(0),\ A^*(0)), \tag{7}$$

なる関係が導びける。

まず，Mori による記憶関数型の縮約の方法を見てみよう。注目していない部分は〃積分する〃というのは昔より非平衡統計力学の鉄則[3]である。我々は今，A(t)のみに注目しているので，$A'(t)$は積分されねばならない。実際に(3)より$A'(t)$を積分して，

$$A'(t) = e^{t\hat{K}_{22}} A'(0) + \int_0^t e^{(t-s)\hat{K}_{22}}\cdot\hat{K}_{21}\cdot A(s)\, ds. \tag{8}$$

これをA(t)の式(2)に代入すると，

$$\frac{d}{dt}A(t) = i\hat{\omega}\cdot A(t) - \int_0^t \varphi(t-s)\cdot A(s)\,ds + f(t), \tag{9}$$

を得る。ここで

$$i\hat{\omega} \equiv (\dot{A}(0), A^*(0))\cdot(A(0), A^*(0))^{-1}, \tag{10.1}$$

$$\varphi(s) \equiv -\hat{K}_{12}\cdot e^{s\hat{K}_{22}}\cdot\hat{K}_{21}, \tag{10.2}$$

$$f(t) \equiv \hat{K}_{12}\cdot e^{t\hat{K}_{22}}\cdot A'(0), \tag{10.3}$$

$$(f(t), A^*(0)) = 0, \tag{10.4}$$

である。

第二種の揺動ー散逸定理は，

$$\begin{aligned} &(f(s), f^*(0))\cdot(A(0), A^*(0))^{-1}, \\ &= \hat{K}_{12}\cdot e^{s\hat{K}_{22}}\cdot(A'(0), A'^*(0))\cdot\hat{K}^*_{12}\cdot(A(0), A^*(0))^{-1}, \\ &= -\hat{K}_{12}\cdot e^{s\hat{K}_{22}}\cdot\hat{K}_{21}, \qquad \longleftarrow \quad (7) \end{aligned} \tag{11}$$

より，

$$\varphi(s) = (t(s), f^*(0))\cdot(A(0), A^*(0))^{-1}, \tag{12}$$

と求められる。(10.1)，(10.4)，(12)の関係を持つ式(9)は揺動力 $f(t)$の explicit な表式を別にすれば，Mori の与えた一般式と同じ結果を与える。

次に，周波数変調型の縮約の方法について述べよう。行列$\hat{K}_{ij}$からなる行列$\hat{\hat{K}}$を導入すると(2)，(3)は，

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} A(t) \\ A'(t) \end{pmatrix} = \hat{\hat{K}}\cdot\begin{pmatrix} A(t) \\ A'(t) \end{pmatrix}, \tag{13}$$

のように書ける。この方程式は解けて，

$$A(t) = \hat{U}_{11}(t)\cdot A(0) + \hat{U}_{12}(t)\cdot A'(0), \tag{14}$$

$$A'(t) = \hat{U}_{21}(t)\cdot A(0) + \hat{U}_{22}(t)\cdot A'(0)\ , \tag{15}$$

となる。ただし，$\hat{U}_{ij}(t)$は，

$$\begin{aligned} &\hat{U}_{11}(0) = 1\ , \qquad && \hat{U}_{12}(0) = 0\ , \\ &\hat{U}_{21}(0) = 0\ , && \hat{U}_{22}(0) = 1\ , \end{aligned} \tag{16}$$

を初期値に持つ行列

$$\hat{U}(t) \equiv e^{t\hat{\hat{K}}}\ , \tag{17}$$

の sub－行列である（14）より，A(0)を解くと，

$$A(0) = \hat{U}_{11}^{-1}(t)\cdot [\ A(t) - \hat{U}_{12}(t)\cdot A'(0)\ ], \tag{18}$$

これを（15）に代入して，

$$A'(t) = \hat{U}_{21}(t)\cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t)\cdot A(t) + [\ \hat{U}_{22}(t) - \hat{U}_{21}(t)\cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t)\cdot \hat{U}_{12}(t)\ ]\cdot A'(0) \tag{19}$$

従って，注目していない量$A'(t)$が注目している量Aの関数として求められたことになる。(19)は(8)に対応した式になっていることは明らかである。この表式を(2)に代入すると，

$$\frac{d}{dt}A(t) = [\ i\hat{\omega} - \Psi(t)\ ]\cdot A(t) + g(t), \tag{20}$$

を得る。ここで，$i\hat{\omega}$は（10．1）のそれと同じであり，又，

$$\Psi(t) \equiv -\hat{K}_{12}\cdot \hat{U}_{21}(t)\cdot \hat{U}_{11}(t), \tag{21.1}$$

$$\begin{aligned} g(t) &\equiv \hat{K}_{12}\cdot [\ \hat{U}_{22}(t) - \hat{U}_{21}(t)\cdot \hat{U}_{11}^{-1}(t)\cdot \hat{U}_{12}(t)\ ]\cdot A'(0), \\ &= [\ \Psi(t)\cdot \hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12}\cdot \hat{U}_{22}(t)\ ]\cdot A'(0)\ , \end{aligned} \tag{21.2}$$

$$(\ g(t),\ A^{*}(0)\ ) = 0\ , \tag{21.3}$$

である。

$\Psi(t)$と g(t)の関係をみるために，（21．1） を微分すると，

$$\dot{\Psi}(t) = -[\hat{K}_{12}\cdot\dot{\hat{U}}_{21}(t) + \Psi(t)\cdot\dot{\hat{U}}_{11}(t)]\cdot\hat{U}_{11}^{-1}(t),$$
$$= -[\Psi(t)\cdot\hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12}\cdot\hat{U}_{22}(t)]\cdot\hat{K}_{21}\cdot\hat{U}_{11}^{-1}(t), \tag{22}$$

となる。ただし，

$$\dot{\hat{U}}_{ij}(t) = \sum_{\ell=1,2}\hat{U}_{i\ell}(t)\cdot\hat{K}_{\ell j}, \tag{23}$$

を用いた。更に，$\psi(t)$を

$$\psi(t) \equiv (g(t), g^*(0))\cdot(A(t), A^*(0))^{-1}, \tag{24}$$

で定義すると，$\hat{U}_{11}(t) = (A(t), A^*(0))\cdot(A(0), A^*(0))^{-1}$, を用いて，（24）は

$$\psi(t) = [\Psi(t)\cdot\hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12}\cdot\hat{U}_{22}(t)]\cdot(A'(0), A'^*(0)),$$
$$\cdot\hat{K}_{12}\cdot(A(0), A^*(0))\cdot\hat{U}_{11}^{-1}(t),$$
$$= -[\Psi(t)\cdot\hat{U}_{12}(t) + \hat{K}_{12}\cdot\hat{U}_{22}(t)]\cdot\hat{K}_{21}\cdot\hat{U}_{11}^{-1}(t), \leftarrow (7), \tag{25}$$

と書ける。従って（22），（25）より，$\Psi(0)=0$，を考慮して，

$$\Psi(t) = \int_0^t \psi(s)\, ds, \tag{26}$$

の関係を得る。（21．3），（24），（26）の関係を持つ式（20）は揺動力 g(t) の explicit な表式を別にすれば Tokwyama と Mori によって提案された周波数変調型の縮約の一般論と同じものを与える。

最後に，周波数変調型の縮約の方法は，記憶関数型とは異ったやり方で注目していない部分を〃積分〃（（15），（19）） していることがわかった。ここに述べた小論で新し

いものが出るというわけではないが，二つの型の縮約の仕方の相違はある程度理解出来ると思う。

文　献

1) H. Mori，Prog. Theor. Phuys. 33 (1965)，423

2) M. Tokuyama and H.Mori，Prog. Theor. Phys. 55 (1976)，No.2

3) R. Zwanzig. J. Chem. Phys. 33 (1960)，1338；
Phys. Rev. 124 (1961)，983

One-spin-flip Ising model における非線形緩和

金沢大理　MC　池　田　　博

One-spin-flip Ising model[1),2)] における critical slowing down[2)] の研究にはいくつかの方法がある。その一つは高温展開法[2),3)] であり，他は計算機 simulation によるモンテ・カルロ法[4)] である。その他にも厳密な不等式[6),7)] や dynamic scaling[4)] があるが，numerical な方法は上の二つである。

最近 Rácz が dynamic scaling law[5)] を基礎として linear と nonlinear の critical slowing down に対する関係式 $\triangle^{\ell} - \triangle^{n\cdot\ell} = \beta$ を導いた。[8)] ここで $\triangle^{\ell}$, $\triangle^{n\cdot\ell}$ はそれぞれ linear と nonlinear の relaxation time[8)] に関する臨界指数，β は磁化の臨界指数，すなわち

$$\tau_{\ell} \sim \varepsilon^{-\triangle^{\ell}}, \quad \tau_{n\cdot\ell} \sim \varepsilon^{-\triangle^{n\cdot\ell}}, \quad M \sim (-\varepsilon)^{\beta}$$

$$\varepsilon = \frac{T}{T_c} - 1 .$$

これに対して one-spin-flip Ising model で今までに得られた結果は，$\beta = 1/8$ の2次元 lattice 上で高温展開法では $\triangle^{\ell} \sim \triangle^{n\cdot\ell} \sim 2.0$[2),9)]，モンテ・カルロ法でも $\triangle^{\ell} \sim \triangle^{n\cdot\ell} \sim 1.9$[4)] であり，わずかな指数の差 1/8 は判別できていない。しかし，実は高温展